

ПРОВЕРКА УСТОЙЧИВОСТИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА Mg-MOF-74

Прищенко Д.А.^{*}

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: clasius@yandex.ru

В данной работе было проведено компьютерное моделирование структуры кристалла Mg-MOF-74. Это соединение принадлежит к классу металлоорганических соединений (MOF) – нанопористых материалов, привлекающих большое внимание [1] со стороны исследователей как одни из наиболее эффективных материалов для удаления парниковых газов из отходов производства.

Для расчета электронной структуры и межатомных сил был использован программный пакет VASP, осуществляющий вычисления в соответствии с теорией функционала электронной плотности. Данные, полученные в ходе электронного расчета, использовались для вычисления фононного спектра по методу замороженных фононов с помощью программы Phonopy.

Для обеспечения корректности расчета фононного спектра была проведена релаксация атомов решетки к их равновесным теоретическим положениям. На основе равновесной структуры был проведен расчет межатомных сил для вычисления динамической матрицы соединения. Все расчеты выполнялись на 2x2x2 суперячейке, содержащей 432 атома.

Затем был получен фононный спектр материала (рис.1). В спектре наблюдается изолированная высокочастотная область фононных состояний на частоте 93 ТГц, образованная колебаниями атомов водорода. Отсутствие мнимых мод говорит об устойчивости атомной структуры рассматриваемого материала.

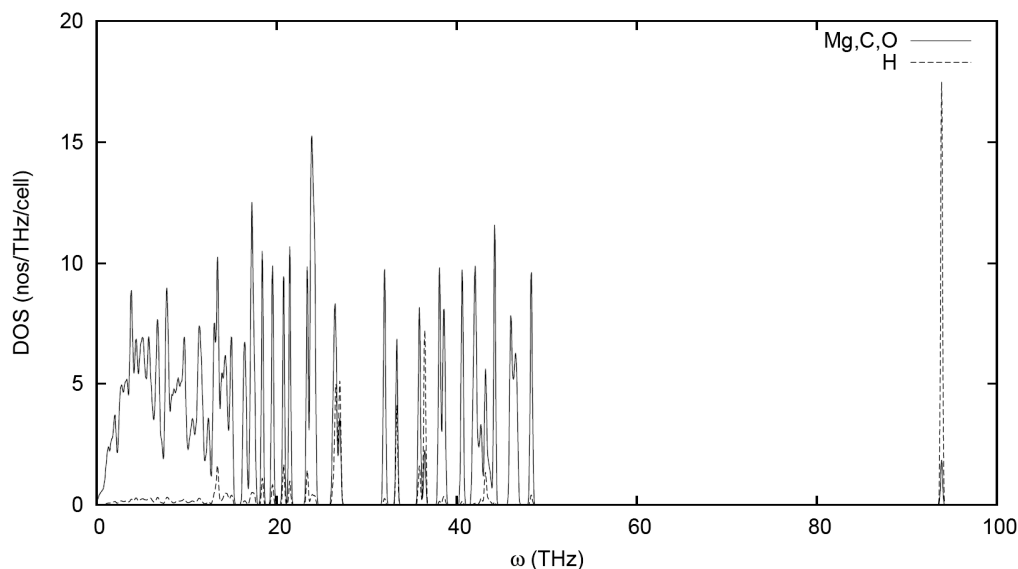


Рис. 1. Плотность фононных состояний Mg-MOF-74

1. Jeffrey B. Kortright, Journal of the American chemical society, 135, 18183 (2013)